

機関番号：14401
 研究種目：基盤研究（B）
 研究期間：2008～2010
 課題番号：20360084
 研究課題名（和文） 複雑流体の流動誘起構造とマクロ流動の統合的数値解析手法に関する研究
 研究課題名（英文） Integrated Numerical Method for Simulation of Flow-Induced Structures and Macro Flows of Complex Fluids
 研究代表者
 山本 剛宏 (YAMAMOTO TAKEHIRO)
 大阪大学・工学研究科・准教授
 研究者番号：40252621

研究成果の概要（和文）：

本研究では、複雑流体の流動誘起構造の数値シミュレーションとマクロ流動計算の統合的計算手法の開発を目指し、ブラウン動力学法を中心とした流動誘起構造シミュレーションモデルの提案と、応力テンソルを介したカップリング手法を用いた流動計算を行なった。また、実験においては、ひも状ミセル分散系について、流動誘起構造とマクロ流動特性の関連を調べ、数値計算モデル開発の知見を得た。

研究成果の概要（英文）：

The present simulation aimed to develop the integrated numerical method for the simulation of flow-induced structures and macro flows of complex fluids. Brownian dynamics simulation models for various fluids were proposed and macro flow analyses coupling with the micro simulation of flow-induced structures via a stress tensor were performed. In experimental studies, the relation between the flow behavior of wormlike micelle dispersion systems and their flow-induced structures was investigated. The experimental results provided useful information and knowledge for the development of numerical models.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2009年度	4,200,000	1,260,000	5,460,000
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
年度			
年度			
総計	10,700,000	3,210,000	13,910,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：複雑流体、流動誘起構造、マイクロ・マクロシミュレーション、数値シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

複雑流体は流体内部に分子・原子レベルよりも大きな構造を有する。そして、複雑流体のもつ流体内部構造は、複雑流体の特異な流動現象やレオロジー特性、あるいは種々の機能性の起源となっている。したがって、流体

内部構造を考慮した複雑流体の流動解析は、複雑流体の流動メカニズムの解析に有効なアプローチと言える。しかし、流動中の流体内部構造を実験により捉えることは困難であり、内部構造を考慮した数値シミュレーションを用いた解析による支援が望まれる。ま

た、数値シミュレーションによる解析においては、従来、各流体に対して提案されている構成方程式をもとに数値解析を行い、流体のレオロジー特性をもとに流れ現象を解析する手法が主流であった。このような手法は後述のマイクロシミュレーションと比較して、計算負荷は低く、複雑な流れ場の解析には適している。しかし、一般に、構成方程式の導出の際に、流体内部構造に関連するマイクロ挙動の情報は平均化や近似のために失われてしまうため、流体内部構造の流動による変化が十分に解析できない。一方、マイクロシミュレーションでは複雑流体を構成する分子のモデル分子や粒子の個々の挙動を、マイクロレベルで計算するため、流体内部構造に関する情報を得ることが可能である。しかし、計算負荷は非常に高くなり、現状では複雑な流れ場の解析への適用は容易ではない。

したがって、複雑流体の内部構造を考慮した流動解析の進展のためには、これらの二つのアプローチをつなぐ数値解析手法に関する研究が望まれていた。

2. 研究の目的

本研究では、複雑流体の流体内部構造の変化とマクロ流動をカップリングして解析するための統合的解析手法を開発するための基礎的研究および知見の蓄積を目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、主として、高分子流体、界面活性剤溶液（ミセル分散系）、サスペンション（粒子分散系）、エマルションを対象に、次の三つの研究アプローチにより研究を遂行した。

(1) 流体内部構造解析のためのマイクロシミュレーションモデルの開発

① ポリマー・クレイ系ナノコンコンポジットの流動誘起構造の数値シミュレーションのために、ディスク状粒子とモデル高分子の多相分散系を考え、ブラウン動力学シミュレーションにより、流動誘起構造およびレオロジー特性の評価を行い、その結果をもとにモデルの改良を行った。

また、マクロ流動解析とのカップリング計算を行なう際の問題点について検討を行った。

② ①の計算モデルは計算負荷の高いものであるため、マクロ流動計算とのカップリングを想定し、ディスク状粒子分散系の疎視化レベルの異なる計算モデルを検討した。

③ ミセル分散系のミセルネットワーク挙動の解析のために、Network Scission Modelに基づくブラウン動力学シミュレーションを行い、実験で見られる特異な挙動の解析への

適用可能性について検討した。

(2) マクロ流動計算と流体内部構造シミュレーションのカップリング計算

① ブラウン動力学シミュレーションにより得られた流体内部構造のデータを統計力学的処理し、そこから見積もられる応力テンソルを介して、マクロ流動解析とのカップリングを行なった。

② 有限要素法をベースにした、マクロ流動と流体内部構造計算とのカップリング手法である CONFESSIT アプローチにより、扁平粒子分散系の流動解析を行った。

③ 種々の複雑流体への適用が可能な数値計算スキームおよび解析手法の検討を行なった。

(3) ひも状ミセル水溶液の流動誘起構造およびレオロジーの実験による解析

対イオンを過剰に添加したひも状ミセル水溶液中では、界面活性剤分子の集合体であるミセルがネットワーク構造を形成する。流動によるネットワーク構造の変化とマクロ流動挙動の関連については不明な点が多く、本研究では、平行平板間のせん断流れを対象に、レオメータを用いたレオロジー特性の測定、可視化実験、流動復屈折測定を行い、ひも状ミセル分散系の特異な流動メカニズムの解明を試みた。

また、実験によって得られた知見を、ひも状ミセル分散系の流動誘起構造計算モデルを検討する際の基礎データとして用いた。

4. 研究成果

(1) 流体内部構造解析のためのマイクロシミュレーションモデルの開発

① ポリマー・クレイ系ナノコンコンポジットの流動誘起構造の数値シミュレーションモデルとして、Gay-Berne ポテンシャルで相互作用する扁平回転楕円体粒子と、有限伸長性非線形弾性ダンベル鎖あるいは可逆ネットワークモデルで表したモデル高分子の分散系を提案した。そして本モデルを用いて、せん断流れ下のブラウン動力学シミュレーションを行い、系の流動誘起構造の解析、レオロジー特性の評価を行い、実際のポリマー・クレイ系ナノコンコンポジットの特性を定性的に記述することが可能であり、本モデルが有効であることが示された。

図 1 に、扁平回転楕円体粒子と可逆ネットワークモデルの系のせん断流れのシミュレーションのスナップショットを示す。

詳細は、5. [雑誌論文] (3), [学会発表]

(2), (8), (11), (17), (20), (21) を参照.

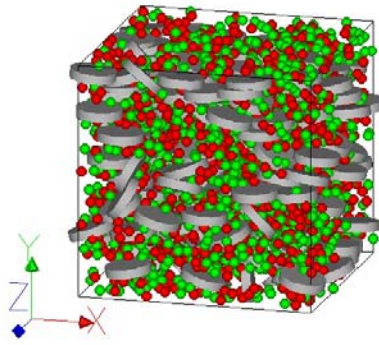


図 1 扁平回転楕円体粒子-可逆ネットワークモデルを用いた、せん断流れのブラウン動力学シミュレーション結果のスナップショット.

② 先に①で示したモデルは、詳細な解析が可能であるが、計算負荷が高く、複雑な流れ場のマクロ流動解析とのカップリングを行うことは非常に難しい. そこで、各モデル高分子の計算により得られる高分子の配向から平均場を求め、各粒子と高分子との相互作用を平均場との相互作用により計算する方法を試みた. そして、計算負荷の大幅な低減が可能となることを確認した.

さらに、濃厚系粒子分散系に対しても、粒子間の相互作用を、平均場を用いたポテンシャル関数で近似することにより、各粒子に作用させる計算方法を適用し、比較的複雑な流れ場への適用可能性が示された. 図 2 に扁平粒子濃厚分散系のコーティング流れへの適用例を示す.

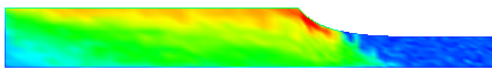


図 2 扁平粒子分散系のコーティング流れの計算例 (配向度分布)

また、可逆ネットワークモデルのように、高分子ネットワークのトポロジーを計算せずに、ネットワークの特性をモデル化する手法は、マクロ流動計算とのカップリングの点で、非常に有効であることが分かった.

③ Network Scission Model により、ミセルの配向と切断・結合を表現し、実験において見られたシアバンディング発生時の速度分布に対して、ブラウン動力学シミュレーションを行い、流動時のミセルの状態を解析した. 本モデルにより、ミセルの配向度や切断・再

結合の割合に関する情報が得られることが分かった.

詳細は、5. [雑誌論文] (1), [学会発表] (7), (10) を参照.

(2) マクロ流動計算と流体内部構造シミュレーションのカップリング計算

① 高分子流体や粒子分散系の構成方程式を導く際に現れる、配向分布の確率微分方程式を直接数値シミュレーションし、その結果から得られる応力を介して、マクロ流動計算とのカップリング計算を行なった. 押出し成形機のスクリー部分 (図 3) の流れを、潤滑近似により単純化したモデルを用いて、高分子融液および扁平粒子希薄分散系の計算を行なった計算結果の一例を図 4, 5 に示す. 図 4 は高分子の平均配向方向 (ダイレクター) の流路幅方向分布を、図 5 は粒子配向分布関数の結果である. 配向分布関数を得るためには非常に多くの粒子に対する計算が必要となるが、ここでは、情報を得たい位置における計算粒子数を部分的に増やすことにより、マイクロシミュレーションをプローブ的に使用し、全体の計算負荷をあまり上げることなく、必要な情報を得る手法を提案した.

詳細は、5. [雑誌論文] (2), [学会発表] (6), (13) を参照.

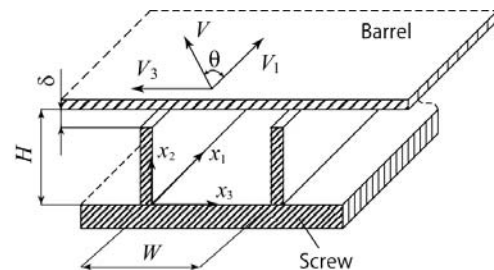


図 3 スクリュー部の概略図

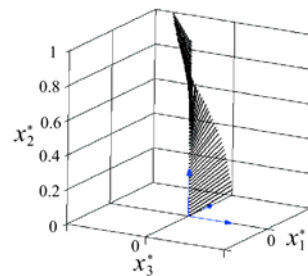


図 4 ダイレクター分布

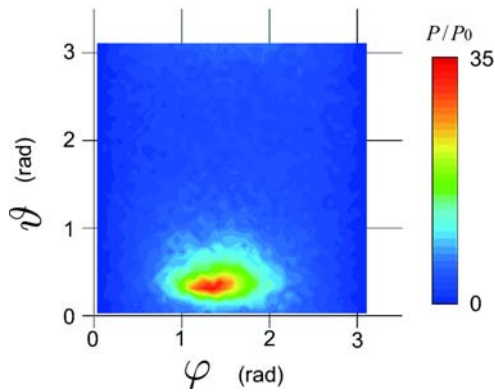


図5 配向分布関数の例

② Brownian Configuration 法を用いて、有限要素法をベースにした流動解析プログラムを作成し、比較的複雑な流れ場における流動解析を試みた。本手法では、分子配向や粒子配向などの流体内部構造を表す変数を、空間内に連続的に分布する関数として近似することにより、ランダム力の分散の影響を低減し、マクロ流動計算とのカップリングが可能となる。本手法のコーティング流れへの適用例を図2に示す。

③ エマルションやフロック形成流体についても種々の疎視化レベルにおける流体内部構造の計算モデル、マクロ流動解析とのカップリングを検討し、計算モデルの作成に対する知見が得られた。

詳細は、5. [学会発表] (3), (9), (19) を参照。

(3) ひも状ミセル水溶液の流動誘起構造およびレオロジーの実験による解析

ひも状ミセル分散系では、ミセルネットワークの流動誘起構造が、系の特異な流動挙動に関係することが指摘されているが、その詳細については、未解明の点が多い。したがって、実験による研究により、これらの解明を目指すとともに、マイクロシミュレーションモデル構築のために必要な情報や知見を得ることが必要となる。

本研究では、ひも状ミセル分散系のせん断流れ下で生じる白濁現象(図6)について、その発生と流動曲線との関連や、流動複屈折測定による流動誘起構造の解析を行い、白濁領域では、比較的大きな構造が配向した状態にあることを見出した。

また、マイクロPTVによる流速測定を行い、シアバンディング構造の発生を確認した。特に、バンド構造が3層以上になるマルチバン



図6 平行円板間のせん断流れにおける白濁現象の発生

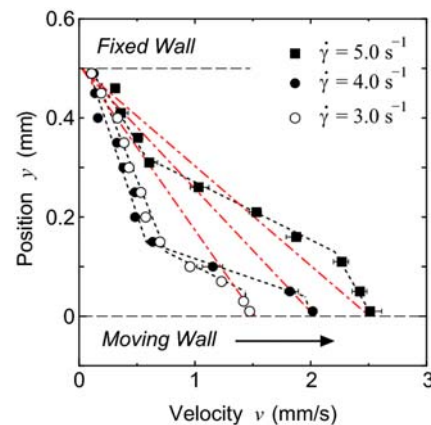


図7 ひも状ミセル分散系のせん断流れにおけるマルチバンド構造発生時の速度分布の例

ド構造の発生を見出した(図7)。

これらの成果は、ミセルネットワークの計算モデルの作成に対する基礎データと知見を与えるものである。

詳細は、5. [雑誌論文] (1), (4), (5), (6) を参照。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計7件)

(1) T. Yamamoto, K. Sawa, Numerical Analysis of Shear Banding Flow of Wormlike Micelle Solutions between Parallel Channels using a Network Scission Model, Nihon Reoroji Gakkaishi, 査読有, Vol. 39 (2011), 105-111

(2) T. Shimizu, T. Yamamoto, Numerical Simulation of Extrusion Flows of Polymer

Melts and Dislike Particle Suspensions Based on Stochastic Calculation of Their Mesoscale Structures, Journal of Fluid Science and Technology, 査読有, Vol. 5 (2010), 403-415

(3) T. Yamamoto, H. Kasama, Brownian Dynamics Simulation of Multiphase Suspension of Disc-Like Particles and Polymers, Rheologica Acta, 査読有, Vol. 49 (2010), 573-584

(4) T. Yamamoto, K. Sawa, K. Mori, Velocity Measurements for Shear Flows of CTAB/NaSal Aqueous Solutions between Parallel Plates, Journal of Rheology, 査読有, Vol. 53 (2009), 1347-1362

(5) A. Yamashita, K. Mori, K. Sawa, T. Yamamoto, Creep Tests, Flow Birefringence Measurements, and Flow Visualization of CTAB/NaSal Systems in Shear Flow between Parallel Plates, Journal of Fluid Science and Technology, 査読有, Vol. 4, (2009), 699-710

(6) 山本剛宏, 加藤有樹, 山下敦史, 細管から射出される界面活性剤水溶液の液滴形成に対する動的表面張力の影響, 日本機械学会論文集 B 編, 査読有, Vol. 75 (2009), 905-912

(7) T. Yamamoto, T. Hashimoto, A. Yamashita, Flow Analysis for Wormlike Micellar Solutions in an Axisymmetric Capillary Channel, Rheologica Acta, Vol. 47 (2008), 査読有, 963-976

[学会発表] (計 25 件)

(1) 山本剛宏, 複雑流体の流動誘起構造とマクロ流動の統合的数値解析手法, 日本伝熱学会関西支部・新エネ流体技術研究会 合同講演会, 2010. 12. 21, キャンパスプラザ京都

(2) T. Yamamoto, N. Kanda, H. Kasama, Brownian Dynamics Simulation of Flow-Induced Mesoscale Structures in Polymer/Clay Nanocomposites, Polymer Processing Society 26th Regional Meeting (PPS-26-IST), 2010. 10. 22, Renaissance Polat Istanbul Hotel (イスタンブール, トルコ)

(3) 市ノ木山 尚士, 山本剛宏, エマルションの流路内流れにおける液滴挙動の数値シミュレーション, 第 58 回 レオロジー討論会, 2010. 10. 6, 仙台国際センター

(4) 山本剛宏, 鈴木遵自, CTAB 水溶液の円管内流れに対する塩注入によるゲル生成現象, 日本機械学会 2010 年度年次大会, 2010. 9. 8, 名古屋工業大学

(5) 山本剛宏, 高分子流体中の微粒子分散系のブラウン動力学シミュレーション, 化学工学会 第 42 回秋季大会 気液固分散工学分科会サロン, 2010. 9. 6, 同志社大学

(6) T. Shimizu, T. Yamamoto, Numerical Simulation of Various Flows of Oblate Particle Dispersion Systems, 5th Pacific Rim Conference on Rheology, 2010. 8. 5, 北海道大学

(7) T. Yamamoto, K. Sawa, Banded Velocity Profile of Wormlike Micellar Solutions between Parallel Plates under Shear Flows, 5th Pacific Rim Conference on Rheology, 2010. 8. 4, 北海道大学

(8) N. Kanda, H. Kasama, T. Yamamoto, Brownian Dynamics Simulation of Polymer/Clay Nanocomposites in Shear Flows, 5th Pacific Rim Conference on Rheology, 2010. 8. 3, 北海道大学

(9) 淵上俊朗, 山本剛宏, フロック形成流体の流れの数値シミュレーション, 日本繊維機械学会 第 63 回年次大会, 2010. 5. 21, 大阪科学技術センター

(10) 沢 和洋, 山本剛宏, 紐状ミセル水溶液のせん断流れにおける速度分布と流動誘起構造, 日本機械学会関西支部 第 85 期定時総会講演会, 2010. 3. 16, 神戸大学

(11) 神田信広, 笠間洋樹, 山本剛宏, ポリマー・クレイ系ナノコンポジットの流動マイクロシミュレーションのための数値計算モデル, 第 87 期 日本機械学会流体工学部門講演会, 2009. 11. 8, 名古屋工業大学

(12) 谷口佳祐, 山本剛宏, ひも状ミセル水溶液の流動誘起構造, 第 87 期 日本機械学会流体工学部門講演会, 2009. 11. 8, 名古屋工業大学

(13) 清水智大, 山本剛宏, 扁平粒子分散系の流動特性の数値シミュレーション, 第 57 回 レオロジー討論会, 2009. 10. 6, 宇部全日空ホテル

(14) 山本剛宏, 笠間洋樹, 神田信広, ディスク状粒子・高分子分散系モデルのブラウン動力学シミュレーション, 第 57 回 レオロジー討論会, 2009. 10. 5, 宇部全日空ホテル

(15) 山下敦史, 山本剛宏, CTAB/NaSal 水溶液の矩形管内流れ, 日本機械学会 2009 年度年次大会, 2009. 9. 15, 岩手大学

(16) 沢 和洋, 山本剛宏, 紐状ミセル水溶液のせん断流れにおける速度分布と流動誘起構造, 日本機械学会 2009 年度年次大会, 2009. 9. 15, 岩手大学

(17) T. Yamamoto, H. Kasama, Brownian Dynamics Simulation of Multiphase Suspension of Disc-Like Model Particles and Model Polymers, 5th Annual European Rheology Conference, 2009. 4. 17, カージフ大学 (カージフ, 英国)

(18) 山下敦史, 山本剛宏, 界面活性剤水溶液の矩形管内流れ, 第 56 回 レオロジー討論会, 2008. 10. 8, 朱鷺メッセ

(19) 市川亮太郎, 山本剛宏, 粘弾性液滴の

流動変形挙動の数値シミュレーション, 第 56 回 レオロジー討論会, 2008. 10. 7, 朱鷺メッセ

(20) 笠間洋樹, 山本剛宏, 扁平回転楕円体粒子分散モデルのブラウン動力学シミュレーション, 第 56 回 レオロジー討論会, 2008. 10. 7, 朱鷺メッセ

(21) 笠間洋樹, 山本剛宏, 扁平回転楕円体粒子分散系のブラウン動力学シミュレーション, 日本流体力学会年会 2008, 2008. 9. 4, 神戸大学

(22) T. Yamamoto, T. Hashimoto, A. Yamashita, Flow Analysis for Wormlike Micellar Solutions in an Axisymmetric Capillary Channel, The XVth International Congress on Rheology, 2008. 8. 5, Monterey Conference Center (モントレイ, アメリカ合衆国)

(23) 山下敦史, 山本剛宏, 界面活性剤水溶液のスリット流路内流れにおける流動特性と流動誘起構造, 日本繊維機械学会 第 61 回年次大会, 2008. 5. 29, 大阪科学技術センター

(24) 沢 和洋, 森 綱規, 山本剛宏, 界面活性剤水溶液のせん断流れにおける速度分布と流動誘起構造, 日本繊維機械学会 第 61 回年次大会, 2008. 5. 29, 大阪科学技術センター

(25) 清水智大, 山本剛宏, Fokker-Planck 方程式に基づく粒子分散系の数値シミュレーション, 日本繊維機械学会 第 61 回年次大会, 2008. 5. 29, 大阪科学技術センター

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本 剛宏 (YAMAMOTO TAKEHIRO)
大阪大学・工学研究科・准教授
研究者番号: 40252621

(2) 連携研究者

保田 和則 (YASUDA KAZUNORI)
愛媛大学・理工学研究科・教授
研究者番号: 80239756

(H20 年まで連携研究者として参画)